

## 有機EL討論会 第23回例会 開催プログラム

2016/10/18

日時	2016年11月17日(木), 11月18日(金)
会場	富山市民プラザ 4階アンサンブルホール
住所	〒930-0084 富山県富山市大手町6番14号
交通	JR 富山駅より徒歩 15 分、セントラム(市内電車)で約 8 分「大手モール」下車

### 11月17日(木)13:00~19:40

12:00 ~ 13:00	開場・受付
---------------	-------

表彰式	司会: 中 茂樹 (富山大学 大学院理工学研究部)
13:00 ~ 13:10	有機EL討論会講演奨励賞

#### S1: 特別講演 I 座長: 上村 強 ((株)ジャパンディスプレイ 次世代研究センター)

S1	13:10 ~ 13:40	有機エレクトロニクス関連技術での富山大学の研究開発について	岡田 裕之	富山大学 大学院理工学教育部
----	---------------	-------------------------------	-------	----------------

#### S2: 材料/デバイス I 座長: 上村 強 ((株)ジャパンディスプレイ 次世代研究センター)

S2-1	13:40 ~ 14:00	発光層ホストに類似TADF材料を用いたリン光素子の特性	岩崎 有希子	NHK放送技術研究所
S2-2	14:00 ~ 14:20	熱活性化遅延蛍光分子をホストとする近赤外発光有機EL素子	永田 亮	九州大学 最先端有機光エレクトロニクス研究センター
S2-3	14:20 ~ 14:40	有機ELと有機太陽電池を用いた生体脈波センサ	Shim Chang-Hoon	九州大学 最先端有機光エレクトロニクス研究センター
	14:40 ~ 14:55	休憩 (15分)		

#### A1: 企業展示広告 座長: 硯里 善幸 (山形大学 有機エレクトロニクスイノベーションセンター)

A1-1	14:55 ~ 15:15 ショートプレゼン (3分/1社)	材料向け分子設計ソフトウェア Materials Science Suite	シュレーディンガー(株)	
A1-2		受託分析サービスのご紹介	(株)東レリサーチセンター	
A1-3		FLUXIM製品のご紹介	サイバネットシステム(株)	
A1-4		有機EL 用透明導電膜とガスバリア膜の薄膜材料	東ソー(株)	
A1-5		受託分析に関する分析事例紹介 ~プロセス汚染評価とデバイス欠陥解析~	住化分析センター(株)	
A1-6		展示会場にて	理研計器(株)	

#### S3: 解析/評価 I 座長: 横山 大輔 (山形大学 大学院理工学研究科)

S3-1	15:15 ~ 15:35	真空チャンパー内の微量不純物がOLEDの寿命に与える影響	藤本 弘	有機光エレクトロニクス実用化開発センター
S3-2	15:35 ~ 15:55	真空チャンパー内の微量不純物の評価	末包 高史	(株)住化分析センター
S3-3	15:55 ~ 16:15	低ダメージ電子ビーム蒸着装置の開発	清水 祐輔	日立造船(株) 機械事業本部
	16:15 ~ 16:30	休憩 (15分)		

#### S4: 解析/評価 II 座長: 中野谷 一 (九州大学 大学院工学研究科)

S4-1	16:30 ~ 16:50	インパルス応答によるTADF 素子の発光タイムパターン解析	森 竜雄	愛知工業大学 工学部
S4-2	16:50 ~ 17:10	変位電流評価法による電気化学発光セルの動作機構解析	野口 裕	明治大学 理工学部

17:40 ~ 19:40	交流会 司会: 熊 均 (出光興産(株) 電子材料部) 会場: 大和デパート6階 レストラン「ザ・ブッフエ」(徒歩3分)
---------------	--

11月18日(金)9:15~16:45

9:00 ~ 9:15	開場・受付
-------------	-------

S5: 特別講演Ⅱ ～有機分子の励起状態ダイナミクスの理解と応用～ 座長: 中野谷 一 (九州大学 大学院工学研究科)

	9:15 ~ 9:20	特別講演開始にあたって	中野谷 一	九州大学 大学院工学研究科
S5-1	9:20 ~ 10:05	光化学の観点から三重項状態を多角的に眺めると	徳丸 克己	筑波大学名誉教授
S5-2	10:05 ~ 10:50	三重項ハーベスト動力学に関するスピルン化学	生駒 忠昭	新潟大学 自然科学系(理学)
	10:50 ~ 11:00	休憩 (10分)		
S5-3	11:00 ~ 11:45	酸素によるイリジウム錯体のりん光消光と生体酸素プローブへの応用	飛田 成史	群馬大学 大学院理工学府分子科学部門
	11:45 ~ 12:00	総合質疑		
	12:00 ~ 13:40	昼食 (100分)		

S6: 材料/デバイスⅡ 座長: 河村 祐一郎 (出光興産(株) 電子材料部)

S6-1	13:40 ~ 14:00	電荷共鳴状態によるTADFの発現とそのメカニズムの解明	細貝 拓也	産業技術総合研究所
S6-2	14:00 ~ 14:20	定常発光時のスペクトルシフトに着目した低濃度TADF薄膜における三重項対消滅	丹羽 顕嗣	大阪府立大学 大学院工学研究科
	14:20 ~ 14:35	休憩 (15分)		

S7: ショート口頭発表 座長: 八尋 正幸 ((公財)九州先端科学技術研究所 有機光デバイス研究室)

S7-1	14:35 ~ 14:40	逆構造有機発光ダイオードにおけるインピーダンス分光と過渡EL	高田 誠	大阪府立大学
S7-2	14:40 ~ 14:45	高感度光電子分光によるCBP薄膜の電子構造観測	山崎 純暉	千葉大学 融合科学研究科
S7-3	14:45 ~ 14:50	フレキシブル有機EL用高分子薄膜の弾性係数の計測	小林 敏郎	津山工業高等専門学校 電子制御工学科
S7-4	14:50 ~ 14:55	HAXPESおよびTOF-SIMSによるAlq <sub>3</sub> /Al界面の分析	安居 麻美	(株)東レリサーチセンター
S7-5	14:55 ~ 15:00	印刷銀補助配線を有する有機EL素子の作製	黒田 大貴	富山大学 大学院理工学研究部
S7-6	15:00 ~ 15:05	コンビナトリアルケミストリーと遺伝的アルゴリズムに基づいた新規材料化合物の探索	吉留 大輔	シュレーディング(株)
	15:05 ~ 15:15	閉会の辞: 熊 均 (出光興産(株) 電子材料部)		
	15:15 ~ 16:45	ポスター討論 (S2, S3, S4, S6, S7)		

【講演形式について】本討論会における各講演発表は、下記①～③のいずれかの講演形式で行います。

①特別講演(S1:30分, S5:45分)

[一般講演]

②一般口頭発表(講演:15分, 質疑:5分)とポスター討論(90分)

③ショート口頭発表(5分, 質疑なし)とポスター討論(90分)

【ポスター討論について】講演者と参加者の討論を促すため、一般講演における口頭発表者が講演会終了後に参加者と討論する場(ポスター討論)を設けます。余裕のある時間とリラックスした雰囲気の中で行われる活発な討論に是非ご参加ください。

【講演奨励賞対象者について】一般口頭発表とショート口頭発表における35歳以下の発表者が講演奨励賞の対象になります。

# 有機EL討論会 第23回例会 プログラム

2016/10/18

日時：2016年11月17日(木)、11月18日(金)

会場：富山市民プラザ 4階アンサンブルホール

〒930-0084 富山市大手町6番14号

交通：JR 富山駅より徒歩15分、セントラム(市内電車)で約8分「大手モール」下車

富山市民プラザアクセス

<http://www.siminplaza.co.jp/?tid=100008>

富山市民プラザ 有機EL討論会例会 会場案内

<http://www.siminplaza.co.jp/?tid=100039>

## 11月17日(木) 13:00~19:40

---

12:00~13:00

開場・受付

表彰式

13:00~13:10

司会：中 茂樹 (富山大学 大学院理工学研究部)

有機EL討論会講演奨励賞

S1：特別講演 I

13:10~13:40

座長：上村 強 ((株) ジャパンディスプレイ 次世代研究センター)

有機エレクトロニクス関連技術での富山大学の研究開発について

富山大学 大学院理工学教育部

○岡田 裕之, 中 茂樹

【要旨】超薄型・超軽量・フレキシブルの特徴を持つ有機エレクトロニクスに関する研究開発が盛んに行われている。TVの大型化も達成された今、印刷技術の適用に期待が掛かる。本発表では、有機ELを中心に富山大学で研究開発してきた技術に加え、関連の有機トランジスタ、有機センシングデバイスと応用技術について、過去から現在までのポイントが何処であったかを振り返って紹介したい。

S2：材料/デバイス I

13:40~14:40

座長：上村 強 ((株) ジャパンディスプレイ 次世代研究センター)

S2-1 発光層ホストに類似 TADF 材料を用いたリン光素子の特性

NHK 放送技術研究所

○岩崎 有希子, 深川 弘彦, 清水 貴央

【要旨】熱活性化遅延蛍光(TADF)材料を発光層ホストとして用いたリン光有機EL素子の高効率・長寿命化を目指して、リン光素子に適したTADFホストについて調べた。類似の分子構造を有するTADF材料をホストとして用い、素子特性及び材料物性を比較することで、ホストからゲストへの十分なエネルギー移動を可能にするホスト材料が素子の長寿命化に重要であることを見出した。

S2-2 熱活性化遅延蛍光分子をホストとする近赤外燐光有機EL素子

九州大学・OPERA\*, JST ERATO\*\*

○永田 亮\*, 中野谷 一\*\*, 安達 千波矢\*\*,

【要旨】従来の近赤外有機EL素子においては、蛍光性ホスト分子からのエネルギー移動過程を利用した場合、励起子生成効率は原理的に25%に留まる。本研究では、熱活性化遅延蛍光(Thermally activated delayed fluorescence: TADF)材料をホスト分子として用いることで、逆項間交差に基づくホスト三重項励起子の利用を可能とし、さらに、

注入電荷バランスを考慮することで、特に 1 $\mu$ m 発光帯における近赤外有機 EL 素子の高効率化に成功した。

S2-3 有機 EL と有機太陽電池を用いた生体脈波センサ

九州大学 最先端有機光エレクトロニクス研究センター\*, 九州大学 産学連携センター\*\*

○Shim Chang-Hoon\*, 友田 崇仁\*, 安達 千波矢\*, 服部 励治\*\*

【要旨】 光電脈波センシングは脈拍数等の生体情報を測定するための非侵襲性センシング方法である。本研究では、軽量で柔軟性に富み、身体への負担が軽く装着性に優れ、フレキシブル基板との互換性が高いことで知られる有機発光ダイオード (OLED) と有機薄膜太陽電池 (OPV) を同一基板上に作成した一体型有機生体センサを開発し、脈拍数・呼吸成分・動脈血酸素飽和濃度の変化などを計測した。

14 : 40~14 : 55

休憩 (15 分)

A1 : 企業展示広告

14 : 55~15 : 15 (各社 3 分)

座長 : 硯里 善幸 (山形大学 有機エレクトロニクスイノベーションセンター)

A1-1 材料向け分子設計ソフトウェア Materials Science Suite

シュレーディンガー (株)

A1-2 受託分析サービスのご紹介

(株) 東レリサーチセンター

A1-3 FLUXiM 製品のご紹介

サイバネットシステム (株)

A1-4 有機 EL 用透明導電膜とガスバリア膜の薄膜材料

東ソー (株)

A1-5 受託分析に関する分析事例紹介 ~プロセス汚染評価とデバイス欠陥解析~

住化分析センター (株)

A1-6 展示会場にて

理研計器 (株)

S3 : 解析/評価 I

15 : 15~16 : 15

座長 : 横山 大輔 (山形大学 大学院理工学研究科)

S3-1 真空チャンバー内の微量不純物が OLED の寿命に与える影響

有機光エレクトロニクス実用化開発センター(i<sup>3</sup>-OPERA)\*, 九州大学最先端有機光エレクトロニクス研究センター (OPERA)\*\*, 株式会社住化分析センター\*\*\*, 九州先端科学技術研究所(ISIT)+

○藤本 弘\*\*, 末包 高史\*\*\*, 柚木 脇 智\*, 永吉 香\*, 今西 克也\*\*\*, 八尋 正幸\*\*,+, 安達 千波矢\*\*,+

【要旨】 真空チャンバー内の不純物が OLED の寿命に与える影響を評価した。チャンバーの汚染度は、ITO 基板を高真空排気したチャンバー内に放置し、その基板の接触角測定により評価した。その結果、OLED の寿命とデバイス製作時間には相関が見られた。このとき、接触角はチャンバー内の滞在時間とともに増大していた。また、チャンバー内の洗浄実験により、水分よりもチャンバー内に存在する不純物が OLED の寿命に影響することを示した。以上の結果から、チャンバー内に浮遊する不純物が OLED 寿命に大きな影響を与えていることが明らかになった。

S3-2 真空チャンバー内の微量不純物の評価

株式会社住化分析センター\*, 有機光エレクトロニクス実用化開発センター(i<sup>3</sup>-OPERA)\*\*、九州大学最先端有機光エレクトロニクス研究センター(OPERA)\*\*\*、九州先端科学技術研究所(ISIT)+

○末包 高史\*, 今西 克也\*, 韋 宏\*, 樋口 純一\*, 藤本 弘\*\*,\*\*\*, 八尋 正幸\*\*,\*\*\*,+, 安達 千波矢\*\*,\*\*\*,+

【要旨】真空チャンパー内に設置した Si 基板上の付着物を測定することにより、デバイスに混入し得るチャンパー内の不純物を評価した。評価法として液体クロマトグラフフーリエ変換型質量分析計(LC-FTMS)を用いた結果、デバイス中には、チャンパー内に残留した有機 EL 材料やその分解物、チャンパーの構成部材由来と推測される化合物等、多数の不純物が混入する可能性があることを明らかにした。

### S3-3 低ダメージ電子ビーム蒸着装置の開発

日立造船株式会社 機械事業本部 システム機械 BU\*, 日立造船株式会社 事業企画本部 戦略企画部\*\*

○清水 祐輔\*, 山成 淳一\*\*, 山田 実\*, 松本 祐司\*

【要旨】当社は、汎用性の高い成膜方法である EB (電子ビーム) 蒸着法を有機 EL 製造に適用するため、従来の EB 蒸着法で問題であった有機層上の金属電極成膜時、性能劣化の因子となる X 線と反射電子の低減、低温・高速成膜が可能な機構を備えた蒸着装置を開発した。さらにより長時間の連続生産に対応するため、線材形状の材料供給機構を備えた EB 蒸着装置を開発した。

16:15~16:30

休憩 (15分)

### S4: 解析/評価 II 16:30~17:10

座長: 中野谷 一 (九州大学 大学院工学研究科)

#### S4-1 インパルス応答による TADF 素子の発光タイムパターン解析

愛知工業大学工学部\*, サン・ウォーター株式会社\*\*

○森 竜雄\*, 魚田 隆\*\*, 魚田 慧\*\*

【要旨】前回、我々は熱遅延化蛍光(TADF)素子を電流インパルス駆動して、その発光タイムパターンを解析することで、発光応答の減衰波形が早い成分と遅い成分の二つに分離できることを示した。これは過渡 PL 法における光照射励起を電圧駆動励起に置き換えたものに相当する。今回は DC バイアスを変えての追測定を行い、同一の伝達関数モデルで発光タイムパターンをシミュレーションできることが確かめた。

#### S4-2 変位電流評価法による電気化学発光セルの動作機構解析

明治大学理工学部

○野口 裕, 日下田 哲也

【要旨】イオン液体(P66614-TFSA)を用いた縦型電気化学発光セル(LEC)の動作機構を変位電流評価法により解析した。発光性ポリマーに F8BT を用いた場合には、電界によるイオンの移動は観測されず、注入電荷によるイオンの再分布が支配的に起こっている様子が観測された。一方、Super yellow を用いた LEC では、電界や注入電荷によるイオンの移動が顕著であり、素子内の電荷再分布とそれに伴う電流特性の過渡的な変化が観測された。

17:40~19:40

交流会

司会: 熊 均 (出光興産 (株) 電子材料部)

会場: 大和デパート 6階 レストラン「ザ・ブッフエ」(徒歩3分)

11月18日(金) 9:15~16:45

---

9:00~9:15

開場・受付

S5: 特別講演 II 9:15~12:00

~有機分子の励起状態ダイナミクスの理解と応用~

座長: 中野谷 一 (九州大学 大学院工学研究科)

特別講演開始にあたって

九州大学 大学院工学研究科

中野谷 一

S5-1 光化学の観点から三重項状態を多角的に眺めると

筑波大学名誉教授

徳丸 克己

S5-2 三重項ハーベスト動力学に関するスピニ化学

新潟大学 自然科学系 (理学)

生駒 忠昭

10:50~11:00

休憩 (10分)

S5-3 酸素によるイリジウム錯体のりん光消光と生体酸素プローブへの応用

群馬大学 大学院理工学府分子科学部門

飛田 成史

11:45~12:00

総合質疑

12:00~13:40

昼食 (100分)

S6: 材料/デバイス II 13:40~14:20

座長: 河村 祐一郎 (出光興産(株) 電子材料部)

S6-1 電荷共鳴状態による TADF の発現とそのメカニズムの解明

産総研\*, CEREBa\*\*, 九州大学 OPERA\*\*\*, JST-ERATO+, Kyulux, Inc.++, ISIT+++, 京都大学化学研究所++++

○細貝拓也\*\*, 松崎弘幸\*\*, 中野谷一\*\*\*+, 徳丸克己\*\*, 筒井哲夫\*\*, 古部昭広\*\*, 那須圭朗++, 野村洸子++, 八尋正幸+++, 鈴木克明++++, 梶弘典++++, 安達千波矢\*\*\*+,

【要旨】熱活性型遅延蛍光(TADF)分子の逆項間交差(RISC)のメカニズムを調べるため、励起一重項状態( $S_1$ )と三重項状態( $T_1$ )のエネルギーレベル差( $\Delta E_{ST}$ )が約0.2 eVと同程度の値を示す一連のカルバゾールベンゾニトリル(CzBN)誘導体の光特性、有機EL特性および励起状態ダイナミクスの関係を包括的に検討した。その結果、TADFの発現や効率性は上記の $\Delta E_{ST}$ に依存せず、カチオン状態が分子内で非局在化する特異な励起状態がその役割を担っており、かつそのような分子群には共通の化学構造があることが分かった。

S6-2 定常発光時のスペクトルシフトに着目した低濃度 TADF 薄膜における三重項対消滅

大阪府立大学大学院工学研究科\*, 大阪府立大学 RIMED\*\*, 九大 OPERA\*\*\*, 九大 JST-ERATO 安達分子エキシトン工学プロジェクト+

○丹羽 顕嗣\*, 長谷山 翔太\*, 小林 隆史\*\*, 永瀬 隆\*\*, 合志 憲一\*\*\*+, 安達 千波矢\*\*\*+, 内藤 裕義\*\*,

【要旨】これまで 4CzIPN の光学特性を調べ、極低温の発光量子収率が三重項対消滅(TTA)のために強い励起光強度を示すことなどを報告した。しかし、薄膜中でホスト材料に対し 5wt% ドープした 4CzIPN 同士で、なぜ電子交換相互作用である TTA が生じるのかは明らかではなかった。そこで本研究ではドープ濃度を変えた薄膜において、発光スペクトルの励起光強度依存から 4CzIPN で生じる TTA 機構について検討した。その結果、フェルスター型の TTA を示唆する結果を得た。

14 : 20~14 : 35

休憩 (15 分)

## S7 : ショート口頭発表

14 : 35~15 : 05

座長 : 八尋 正幸 ((公財)九州先端科学技術研究所 有機光デバイス研究室)

### S7-1 逆構造有機発光ダイオードにおけるインピーダンス分光と過渡 EL

大阪府立大学\*, 大阪府立大学分子エレクトロニックデバイス研究所\*\*

○高田 誠\*, 小林 隆史\*\*, 永瀬 隆\*\*, 内藤 裕義\*\*,

【要旨】 Poly(9,9-dioctylfluorene-alt-benzothiadiazole) (F8BT) を発光材料とした逆構造有機発光ダイオード (iOLED) において、インピーダンス分光測定により、実際に動作する iOLED を用いた電子および正孔移動度の同時測定を行った。得られた電子および正孔移動度はそれぞれ、 $10^{-3} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 、 $10^{-5} \text{ cm}^2/\text{Vs}$  台であった。iOLED の過渡 EL スペクトル中の特徴的な時間を見出し、インピーダンス分光で得られた輸送特性に基づき、過渡 EL 特性についても考察した。

### S7-2 高感度光電子分光による CBP 薄膜の電子構造観測

千葉大学融合科学研究科\*, 千葉大学先進科学センター\*\*, 千葉大学 MCRC\*\*\*

○山崎 純暉\*, 佐藤 友哉\*, 田中 有弥\*\*, 石井 久夫\*\*\*,

【要旨】有機 EL 材料として広く用いられる CBP のギャップ内準位も含めた状態密度を高感度光電子分光により調べた。閾値イオン化エネルギーは 5.92eV となり、HOMO 準位は 6.5eV を中心に 5.5eV あたりまでガウス分布していることがわかった。スペクトルの励起光のエネルギー依存性を測定すると、7 桁におよぶダイナミックレンジで微弱な状態を観察できることがわかった。その結果、フェルミ準位よりも浅いエネルギー領域から三重項励起子によると考えられる光電子放出を観測した。このことは、高感度光電子分光が三重項励起子準位の状態密度の評価法となりうる可能性を示唆している。

### S7-3 フレキシブル有機 EL 用高分子薄膜の弾性係数の計測

津山工業高等専門学校 電子制御工学科\*, 兵庫県立大学 高度産業科学技術研究所\*\*, 鈴鹿工業高等専門学校 材料開発工学科\*\*\*, Q-Light+

○小林敏郎\*, 内海裕一\*\*, 兼松秀行\*\*\*, 柘田剛+

【要旨】ナノインデントを用いて、ガラス基板上に製膜された有機 EL 材料薄膜の弾性率が測定された。フレキシブル有機 EL のロールツウロール製造プロセスにおいては、残留応力や反りの観点から、有機薄膜の機械的物性を把握しておくことは重要である。本報告においては、Alq<sub>3</sub>, NPD, Alq<sub>3</sub> と NPD の混合層, IZO について弾性率の測定を行った結果を示す。また、応力と歪の関係についても指数則を仮定して考察を加えた。

### S7-4 HAXPES および TOF-SIMS による Alq<sub>3</sub>/Al 界面の分析

株式会社東レリサーチセンター\*, 九州大学最先端有機光エレクトロニクス研究センター\*\*

○安居 麻美\*, 小川 慎吾\*, 宮田 洋明\*, 柴森 孝弘\*, 宮本 隆志\*, 安達 千波矢\*\*

【要旨】電子輸送層である tris (8-hydroxyquinolino) aluminium (Alq<sub>3</sub>) 膜上に成膜方法が異なる Al 膜を形成した際の Alq<sub>3</sub>/Al 界面近傍の化学状態を硬 X 線光電子分光法 (HAXPES) および飛行時間型二次イオン質量分析法 (TOF-SIMS) により調べた。Ar ガスクラスターイオン (GCIB) を用いた TOF-SIMS デプスプロファイル分析の

結果、Al 膜の成膜方法（スパッタ法または真空蒸着法）により Alq<sub>3</sub>/Al 界面近傍で増加する Alq<sub>3</sub> の分解物成分に違いがあることが分かった。

#### S7-5 印刷銀補助配線を有する有機 EL 素子の作製

富山大学大学院理工学研究部\*, 株式会社写真化学\*\*, 株式会社エスケーエレクトロニクス\*\*\*

○黒田 大貴\*, 中 茂樹\*, 岡田 裕之\*, 北澤 裕之\*\*, 奥村 雅仁\*\*\*, 西村 達也\*\*\*

【要旨】ITO 電極の代替を目指し、高精細ガラス版（(株)エスケーエレクトロニクス提供）を用いた印刷法により最小線幅 3 μm の Ag 補助配線電極を形成（(株)写真化学 作成）し、導電性高分子である poly(ethylenedioxythiophene):poly(styrene-sulfonate) (PEDOT:PSS) を組み合わせ陽極とした有機 EL 素子を作製した。PEDOT:PSS 膜厚の最適化で開口部からの発光が得られ、印刷 Ag が補助配線として機能することが分かった。

#### S7-6 コンビナトリアルケミストリーと遺伝的アルゴリズムに基づいた新規材料化合物の探索

シュレーディングー (株) \*, Schrödinger, Inc., NY\*\*, Schrödinger, Inc., CA \*\*\*

○吉留 大輔\*, 森里 嗣生\*, H. Shaun Kwak\*\*, Woody Sherman\*\*, Mathew D. Halls\*\*\*

【要旨】本研究では、新規の有機 EL 材料探索に向けた仮想化合物構造の発生手法と計算化学を利用した候補化合物の絞り込み、得られた構造群の多様性について検証を行った。原子置換とコンビナトリアルケミストリーに基づいた仮想化合物の発生、および遺伝的アルゴリズムを適用した新規化合物の提案により、良好なオプトエレクトロニクス物性を示す候補化合物を予測し、合わせてこれらの手法によりケミカルスペース拡張の様子が異なることを確認した。

15 : 05 ~ 15 : 15

閉会の辞

実行委員長：熊 均（出光興産（株） 電子材料部）

#### ポスター討論

15 : 15 ~ 16 : 45

【備考】○：登壇者を示す。

【講演形式について】本討論会における各講演発表は、下記①～③のいずれかの講演形式で行います。

①特別講演（S1 : 30 分, S5 : 45 分）

②一般口頭発表（講演 : 15 分, 質疑 : 5 分）とポスター討論（90 分）

③ショート口頭発表（5 分 : 質疑なし）とポスター討論（90 分）

【ポスター討論について】講演者と参加者の討論を促すため、一般講演における口頭発表者が講演会終了後に参加者と討論する場（ポスター討論）を設けます。余裕のある時間とリラックスした雰囲気の中で行われる活発な討論に是非ご参加ください。

【講演奨励賞対象者について】一般口頭発表とショート口頭発表における 35 歳以下の発表者が講演奨励賞の対象になります。

【企業展示】シュレーディングー（株）、（株）東レリサーチセンター、サイバネットシステム（株）、理研計器（株）、東ソー（株）、住化分析センター（株）